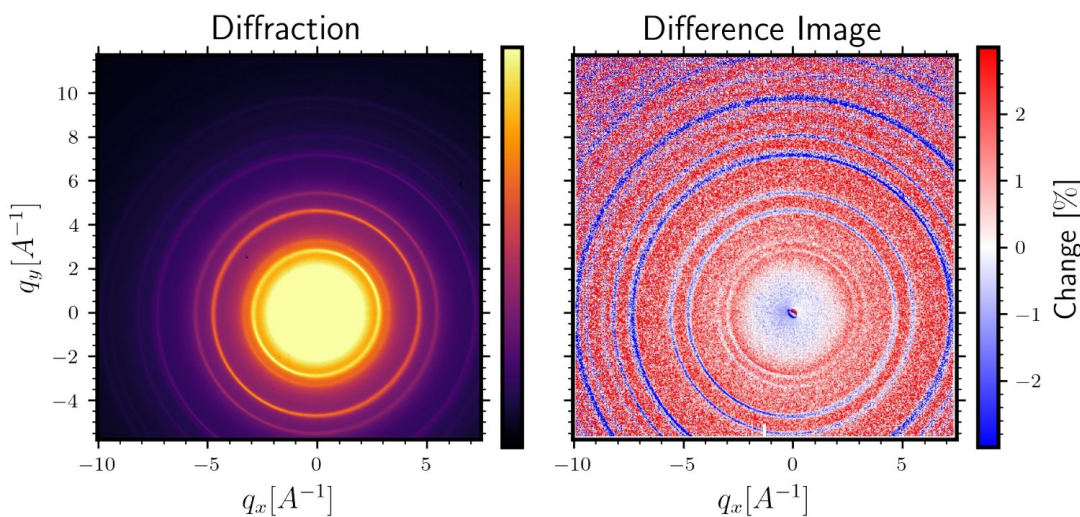


Electron-Phonon coupling is the interaction of electrons with the lattice system and determines many physical properties such as the electrical and thermal conductivity.

Ultrafast electron diffraction enables us to investigate the electron-phonon coupling experimentally: Energy that is transferred from the electron system to the lattice system enhances the thermal movement of the lattice atoms. That in return leads to a decrease of the diffraction intensity. This phenomena is known as the **Debye-Waller effect**.

In this thesis we will predict the Debye-Waller effect using density functional theory and compare the simulation results with experimental data. First for simple systems and later followed by more complex materials.



Electron diffraction (left) and difference image (right) of a polycrystalline aluminum film after laser excitation.

The intensity of the Bragg reflexes (rings) decreases after laser excitation, as energy is transferred to the lattice by electron-phonon coupling

Tasks:

- Calculation of phonon dispersion relations
- Developing tools to simulate diffraction patterns including lattice vibrations
- Comparison with experimental data

Requirements:

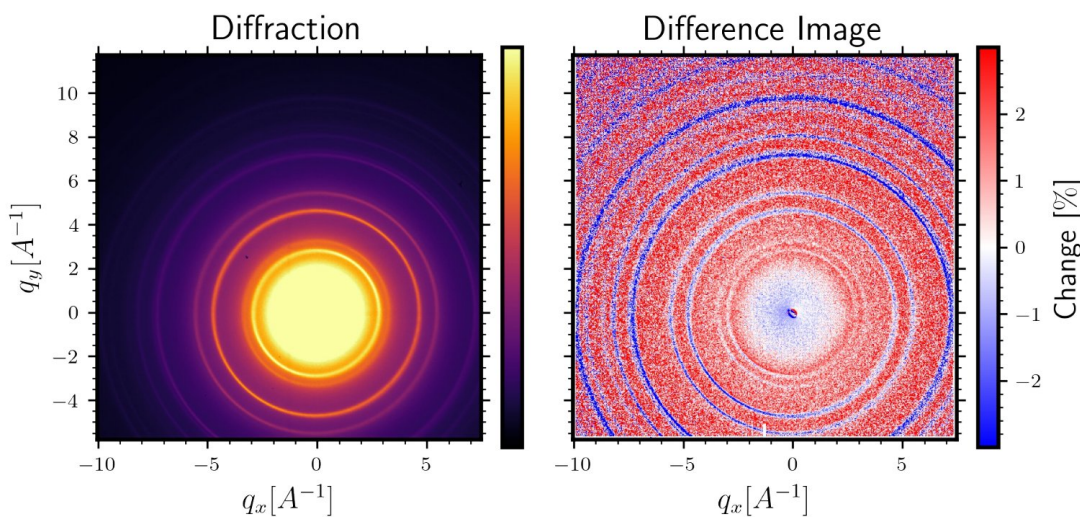
- Don't be afraid of math
- Basic programming skills go a long way (but are not necessary)
- ... don't forget to have fun while you're at it :)

contact: Sebastian Hammer
 email: sebastian.hammer@uni-wuerzburg.de
 room: C039

Die **Elektronen-Phonon-Kopplung** beschreibt die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Gittersystem und bestimmt eine Vielzahl physikalischer Größen wie etwa die elektrische und thermische Leitfähigkeit.

Mit Hilfe der ultraschnellen Elektronenbeugung lässt sich die Elektronen-Phonon-Kopplung experimentell untersuchen: Energie, die vom Elektronensystem in das Gittersystem übertragen wird, führt zu einer verstärkten thermischen Bewegung der Gitteratome. Dadurch verringert sich die Intensität der Beugungsreflexe – ein Phänomen, das als **Debye-Waller-Effekt** bezeichnet wird.

In dieser Arbeit soll der Debye-Waller-Effekt zunächst für einfache und anschließend für komplexere Systeme mittels Dichtefunktionaltheorie vorhergesagt und die theoretischen Ergebnisse mit experimentellen Daten verglichen werden.



Elektronenbeugungsbild (links) und Differenzbild (rechts) eines polykristallinen Aluminiumfilms nach Laseranregung.

Die Intensität der Bragg-reflexionen (Ringe) nimmt nach Laseranregung ab, da durch Elektronen-Phononen Wechselwirkung Energie ins Gittersystem übertragen wurde.

Deine Aufgaben:

- Berechnung von Phononendispersionsrelationen
- Weiterentwicklung von Werkzeugen zur Simulation von temperaturabhängigen Beugungsbildern
- Vergleich der Simulationen mit experimentellen Daten

Anforderungen:

- Keine Angst vor ein bisschen Mathematik
 - Grundlegende Programmierkenntnisse sind von Vorteil (aber nicht nötig)
- ... und natürlich Spaß an der Physik!

Kontakt: Sebastian Hammer

Email: sebastian.hammer@uni-wuerzburg.de

Raum: C039